

композита представлен на (рис.2). Из него следует, что данный композит имеет максимальное поглощение энергии на уровне 8 дБ в области более высоких частот (7-12 ГГц). Имеется несколько механизмов, способствующих поглощению СВЧ-энергии композитом. В цепочках проводящего компонента композита, размещенного в электромагнитном поле, появляются токи Фуко. Кроме того, в переменном электромагнитном поле могут возникать резонансные процессы при перемагничивании малых кластеров железа. И, наконец, энергия поля расходуется на диэлектрическую поляризацию матрицы.

Таким образом, экспериментально показано, что новые синтезированные пластичные композиты обладают как пьезорезистивностью, так и существенным поглощением электромагнитной энергии в области частот 3-12 ГГц.

Список публикаций:

- [1] Кабиров Ю.В., Богатин А.С., Сидоренко Е.Н., Белокобыльский М.В., Михейкин А.С., Летовальцев А.О., Буланова А.Л., Пруцакова Н.В. // Письма о материалах. 2019. В.9. №2. С.223.  
 [2] Sidorenko E.N, Privalov E., Demchenko A.A, Kabirov Yu.V, Chebanova E.V, Nathan I.I. // Conference Proceedings - 2019 Radiation and Scattering of Electromagnetic Waves, RSEMW 2019 8792715, С. 464.  
 [3] Сидоренко Е. Н., Гавриляченко В. Г., Турик А. В, Семенчев А. Ф., Натхин И. И. //Электромагнитные волны и электронные системы. 2013 Т. 18. №9. С.51.

## Электронное строение германена с точечными дефектами замещения

**Захаров Николай Владимирович**

**Бутин Антон Владиславович**

*Волгоградский государственный университет*

*Лебедев Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н.*

[anonymmisterx@mail.ru](mailto:anonymmisterx@mail.ru)

Германен – это двумерный полупроводниковый наноматериал, впервые полученный экспериментально в 2014 году [1]. Подобно графену он имеет две атомные подрешетки, смещенные друг относительно друга и составленные из атомов германия. С точки зрения зонной теории, важным преимуществом над графеном является существующая возможность создания запрещённой зоны путём приложения электрического поля перпендикулярно поверхности материала, что открывает путь к созданию полевого транзистора, работающего при комнатной температуре. Существуют расчёты, свидетельствующие в пользу возможности наблюдения в германене спинового эффекта Холла. На основе вычислений при помощи теории функционала плотности показано, что германен должен сохранять высокую структурную стабильность при создании в нём механических напряжений.

Целью данного исследования является изучение электронного строения германена с точечными дефектами замещения. Для моделирования геометрической структуры германена использовалась модель молекулярного кластера с граничными псевдоатомами [2 - 4], в качестве которых выбирались одновалентные атомы водорода. Выбранный кластер представляет собой фрагмент поверхности германена размером 6×6 элементарных ячеек (рис. 1). Разорванные граничные связи замыкались атомами водорода. Дефекты структуры (X) помещались в центре кластера, чтобы уменьшить влияние граничных связей. В качестве точечных дефектов рассмотрены изоморфные (Si, Sn), донорные (P, As, Sb) и акцепторные (Al, Ga, In) дефекты.

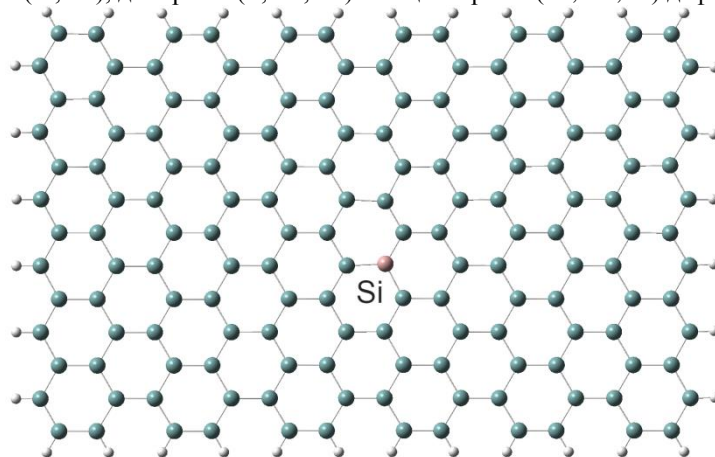


рис.1. Фрагмент поверхности германена с точечным дефектом

Расчёт электронного строения поверхности построенной модели германен выполнен с помощью неограниченного метода Хартри-Фока в базе атомных орбиталей STO-3G. Основные электронно-энергетические характеристики германена (длины межатомных связей Ge-X  $R(\text{Ge-X})$ ; энергии верхней занятой  $E_{\text{ВЗМО}}$  и нижней вакантной  $E_{\text{НВМО}}$  молекулярных орбиталей; малликовские заряды на дефектах X и ближайшем атоме Ge), как идеального, так и с точечными дефектами представлены в таблице.

Структура Ge- <i>n</i> +X	$R(\text{Ge-X}), \text{\AA}$	$E_{\text{ВЗМО}}, \text{эВ}$ ( $\alpha / \beta$ )	$E_{\text{НВМО}}, \text{эВ}$ ( $\alpha / \beta$ )	$q(\text{Ge}) / q(\text{X})$
Ge-6	-	-1.08 / -1.08	-0.81 / -0.81	0.03 / -
Ge-6+Si	2.1	-0.01 / -0.01	0.03 / 0.03	-0.07 / 0.23
Ge-6+Sn	2.1	-0.01 / -0.01	0.04 / 0.04	-0.08 / 0.22
Ge-6+P	2.1	-0.1 / -0.07	0.16 / 0.14	0.03 / -0.08
Ge-6+As	2.3	-0.10 / -0.06	0.16 / 0.14	0.07 / -0.22
Ge-6+Sb	2.1	-0.08 / -0.08	0.14 / 0.16	0.02 / -0.12
Ge-6+Al	2.3	-0.10 / -0.12	0.15 / 0.14	-0.20 / 0.70
Ge-6+Ga	2.1	-0.07 / -0.08	0.004 / 0.03	0.06 / -0.39
Ge-6+In	2.1	-0.1 / -0.12	0.12 / 0.14	-0.10 / 0.36

Как следует из результатов, представленных в таблице, точечные дефекты сильно изменяют электронное строение фрагмента германена. Энергии  $E_{\text{ВЗМО}}$  и  $E_{\text{НВМО}}$  сильно возрастают по сравнению с бездефектной структурой, однако разница между энергиями (эффективная запрещенная щель) изменяется мало. Это означает, что свойства двумерной поверхности существенно не изменяются. Скорее всего, увеличение концентрации дефектов может привести к значимым вариациям энергетической щели и, следовательно, изменению физических свойств данной структуры.

Список публикаций:

- [1] Acun A., Zhang L., Bampoulis P., Farmanbar M., Van Houselt A., Rudenko A.N., Lingenfelder M., Brocks G., Poelsema B., Katsnelson M.I., Zandvliet H.J.W. // *Germanene the germanium analogue of graphene* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2015. V.27. 443002 (11pp).
- [2] Степанов Н.Ф. // *Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.*
- [3] Лебедев Н. Г. // *Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов: учебное пособие. В 3 частях. Часть 1. Метод Хартри-Фока. Волгоград: Издательство ВолГУ, 2010. 116 с.*
- [4] Лебедев Н. Г., Литинский А.О. // *Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов: учебное пособие. В 3 частях. Часть 2. Кластерные модели твердых тел. Волгоград: Издательство ВолГУ, 2010. 108 с.*

## Дилатометрические исследования процесса термостабилизации полиакрилонитрильного волокна

<sup>1</sup>Иргалина Регина Ильфатовна

<sup>1</sup>Фазлитдинова Альфия Габдиловна, <sup>1</sup>Тюменцев Василий Александрович

<sup>1</sup>Челябинский государственный университет

Фазлитдинова Альфия Габдиловна

[mariya-fks@mail.ru](mailto:mariya-fks@mail.ru)

Одним из основных видов армирующих элементов, который применяется при создании композиционных материалов, являются углеродные волокна (УВ). Основные сферы использования УВ считается авиакосмическая промышленность, автомобилестроение, кораблестроение и энергетика. Углеволоконистые материалы можно получить с помощью специально разработанных технологических процессов. И в качестве первичного исходного сырья используются различные полимерные волокна, чаще всего полиакрилонитрильные (ПАН).

Существующая технология производства УВ проводится, как правило, в трех последовательных стадий термообработки исходного волокна: термостабилизации, карбонизации и графитации. После стадии термостабилизации нити полимерного волокна приобретают структуру, которая необходима для получения требуемого качества УВ и приводит к образованию поперечных химических связей между макромолекулами полимера. На этапе карбонизации они приобретают достаточно высокую прочность и на 80-95% состоят из элементарного углерода, а после графитации получают конечный продукт - графитизированное углеродное волокно с кристаллической структурой. Стадия термостабилизации является наиболее продолжительной по времени, а также энергоёмкой.